



TITLE:

23.IT型遷移金属ダイカルコゲナイド層間化合物 M_xTiS_2 の電子構造
(大阪大学基礎工学研究科物理系専攻物性分野,修士論文アブストラクト(1985年度)その2)

AUTHOR(S):

山崎, 隆浩

CITATION:

山崎, 隆浩. 23.IT型遷移金属ダイカルコゲナイド層間化合物 M_xTiS_2 の電子構造(大阪大学基礎工学研究科物理系専攻物性分野,修士論文アブストラクト(1985年度)その2). 物性研究 1986, 46(5): 739-740

ISSUE DATE:

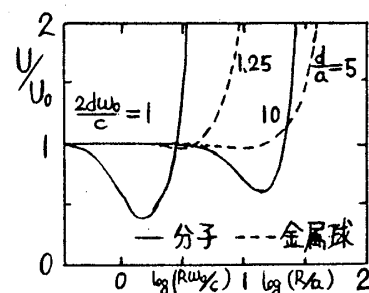
1986-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92236>

RIGHT:

以外の場合磁気的な項の寄与は非常に小さい。
壁が金属の場合には、壁の効果を壁の中にイメージダイポールを想定することで置き換えられる。
電氣的ダイポールのイメージは図の様に壁に垂直な成分は同じ向き、平行な成分は向きが交互に変わる。遅延の効果を無視すれば、現実のダイポールと違う向きのイメージは分散力を弱め、同じ向きのイメージは分散力を強める働きをする。このことから粒子間の距離 R が比較的小さな領域では壁に平行な 2 成分のイメージが分散力を弱め、 R が大きい領域では壁に垂直な成分の巨大イメージダイポールが形成され、これにより分散力が強められると理解される。しかし実際には、遅延の効果でイメージからの距離によって位相が変わるので、これほど単純には考えられない。磁気的な壁の効果は、電氣的なものとは性質が異なっていることも報告する。



23. 1T 型遷移金属ダイカルコゲナイド層間化合物 $M_x\text{TiS}_2$ の電子構造

山 崎 隆 浩

1T 型層状遷移金属ダイカルコゲナイド TiS_2 の層間に 3d 遷移金属をインターカレートした $M_x\text{TiS}_2$ ($M = 3d$ 遷移金属) は磁性及び輸送現象に興味深い現象を示す。これらの層間化合物の磁性、輸送現象及びインターカレーションの構造を理論的に解明するために、電子状態の計算を行なってきた。 $M_x\text{TiS}_2$ の電子帯構造の計算は、マッフィーン-ティン球近似を使った self-consistent APW 法を用いて行なった。電荷密度の決定は $1/100$ Ry の精度内でエネルギー固有値が求まるように行なった。実際の計算は、比較的結晶構造の簡単な TiS_2 , FeTiS_2 , CrTiS_2 , $\text{Fe}_{1/3}\text{TiS}_2$ の常磁性状態に対して行なった。 FeTiS_2 , $\text{Fe}_{1/3}\text{TiS}_2$ のフェルミレベルは状態密度のピーク付近にあり、そこでの状態密度 $\rho(E_F)$ は大きな値を持ち、強磁性のしやすい実験結果と対応する。しかし、 $\text{Fe}_{1/3}\text{TiS}_2$ の $\rho(E_F)$ は FeTiS_2 の $\rho(E_F)$ の半分程度の値である。このことは $\text{Fe}_{1/3}\text{TiS}_2$ の $T_C (= 55\text{K})$ は FeTiS_2 の $T_C (= 160\text{K})$ に比べて低いという実験事実と対応している。また $\text{Fe}_{1/3}\text{TiS}_2$ の $\rho(E_F)$ には、Fe の 3d 成分

が同程度に寄与している。従って、 $\text{Fe}_{1/3}\text{TiS}_2$ の磁気モーメントは Fe site からだけではなく、Ti site から誘起される割合も大きいと考えられる。Bonding, Antibonding, Nonbonding-Band の概念を用いて、Fe がインターカレートされていくにつれて状態密度が変化する様子を見ると、Fe と S の Bonding-Band と Ti と S の Bonding-Band が、Fe と S の Antibonding-Band と Ti の Nonbonding-Band がそれぞれ重なり、Bonding-Band と Ti の Nonbonding-Band の間に、Fe の Nonbonding-Band が入り込み、Ti の Nonbonding 及び Ti と S の Antibonding-Band を押上げているのが分かった。 FeTiS_2 に対しては、強磁性状態での電子帯構造の計算も行ない、それぞれの原子のもつ磁気モーメントの大きさを求めた。1 原子あたり Fe で $2.1 \mu_B$ 、Ti で Fe と逆向きに $0.4 \mu_B$ を得た。

24. Fe-Pt 合金におけるマルテンサイト変態の研究

武藤 俊 介

組成比 3 : 1 付近の Fe-Pt 合金のマルテンサイト変態 (FCC \rightarrow BCC (BCT)) は、母相の規則化 ($L1_2$ 型規則格子) とともに、その変態様式が非熱弾性型から熱弾性型へ移行し、変態開始温度は急激に低下することが知られている。近年、規則化した Fe_3Pt 合金は一貫 FCT 相を経由して BCT マルテンサイト相へ変態する事が見出され、FCT 相は、その際の遷移相であると考えられている。

また、Fe-Pt 合金は耐食性に優れ、従来電子顕微鏡観察のための薄膜作成が極めて困難であるため、その変態機構を解明するための内部組織に関する知見は非常に少ない。

今回、その薄膜作成法を確立し、電子顕微鏡による変態その場観察に初めて成功した。本研究では、Fe-Pt 合金のマルテンサイト変態を試料の組成、規則度を変え、X線回折、電気抵抗、光顕及び電顕観察により詳細に検討した。

FCC-FCT 変態においてはその前駆現象として内部組織に、“ツイード構造”と呼ばれる異常コントラストが生じることが知られている。このツイード構造は、電子回折図形に逆格子の 110 方向の散漫散乱を生じること、また反射条件により、コントラストの消滅則が存在することから、正方歪みを伴った微小領域の集合体による歪み場コントラストであり、また 1 つ 1 つの歪んだ領域は FCT 相の核と考えられる。